

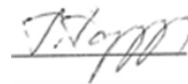
МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Актуализировано:
на заседании кафедры аналитической химии
протокол №18 от «29» мая 2017 г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета



Зав. кафедрой _____ /Майстренко
В.Н.



/Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Дисциплина **Физические методы исследования**

Базовая часть Б1.В.ОД.8

программа бакалавриата


Направление подготовки (специальность)
04.03.01 «Химия»

Направленность (профиль) подготовки

Аналитическая химия

Квалификация

Бакалавр

Разработчик (составитель) Доцент, к.х.н, доцент (должность, ученая степень, ученое звание)	 /Ширяева Р.Н. (подпись, фамилия И.О.)
--	--

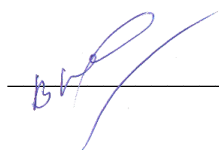
Для приема : 2016 г.

Уфа 2017 г.

Составитель / составители: к.х.н., доц.Ширяева Р.Н.

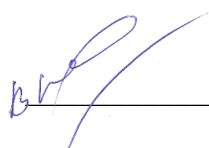
Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры аналитической химии протокол №18 от «29» мая 2017 г..

Заведующий кафедрой

 / Майстренко В.Н.

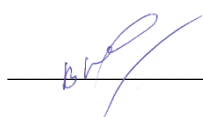
Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), утверждены на заседании аналитической химии протокол № 18 от «21» мая 2018 г.

Заведующий кафедрой

 / Майстренко В.Н./

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры аналитической химии, протокол № 23 от «13» мая 2019 г.

Заведующий кафедрой

 / Майстренко В.Н.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	6
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	7
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	10
4.3. <i>Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)</i>	12
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	20
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	20
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	20
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	20

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных
спланируемыми результатами освоения образовательной программы
(с ориентацией на карты компетенций)**

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Результаты обучения ¹		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания			
	стандартных методов получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	основных методов синтеза и анализа химических веществ ,принципов работы стандартных лабораторных приборов	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	оборудования и программ, предназначенных для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	ПК- 2владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Основных этапов развития химии; научные достижения наиболее выдающихся отечественных и зарубежных химиков	ПК- 4 способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
Умения	Проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Выполнить основные операции ,выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК -1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при	

¹Должны соответствовать картам компетенций.

	использованием специализированных компьютерных программ	проведении научных исследований	
	Оценивать химические понятия и законы в сложной системе воззрений современной химии	ПК- 4 способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть навыками проведения эксперимента и методами обработки его результатов	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
	Способностью применения основных естественнонаучных законов при анализе полученных экспериментальных данных	ПК- 4 способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при обсуждении полученных результатов	

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Физические методы исследования» относится к базовой части.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре.

Цели изучения дисциплины : ознакомление студентов с принципиальными основами, практическими возможностями и ограничениями важнейших для химиков физических методов исследования ,знакомство с их аппаратурным оснащением и условиями проведения эксперимента.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: при освоении данной дисциплины требуются самые высокие знания, умения и навыки, приобретённые в результате освоения всех предшествующих дисциплин, особенно таких, как органическая химия, физическая химия, строение вещества, физика, аналитическая химия, иностранный язык.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода получения, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ	Знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
Второй этап (уровень)	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Не умеет	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии; одно- и двухстадийный синтез по предлагаемой методике с выходом целевого продукта согласно заявленному в методике; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленными требованиями
Третий этап (уровень)	Владеть: базовыми навыками проведения эксперимента и методами обработки его	Не владеет	В полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными

	результатов		методами диагностики веществ (материалов) и методами обработки результатов эксперимента
--	-------------	--	---

ПК-1 Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: Основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципы работы стандартных лабораторных приборов	Фрагментарные представления о методах работы в лаборатории	Знает сформированные систематические знания о методах синтеза и анализа химических веществ .принципы работы стандартных лабораторных приборов
Второй этап (уровень)	Уметь: выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Фрагментарное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Умеет успешно и систематически выполнять стандартные лабораторные операции
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Фрагментарное владение навыками работы на стандартном оборудовании	Владеет навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам

ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: Стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований ,идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов	Затрудняется в выборе метода применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований .идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила

	работы ,нормы ТБ	свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ, но допускает ошибки	техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
Второй этап (уровень)	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Умеет проводить некоторые химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает ошибки	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии с использованием современной аппаратуры;проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента с соответствием с заявленными требованиями
Третий этап (уровень)	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет некоторыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, но допускает ошибки	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований,идентификации и изучения свойств веществ и материалов ,правильного протоколирования опытов

ПК-4 способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при обсуждении полученных результатов

Этап (уровень) освоения компетенци и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: основные этапы развития химиинаучные достижения наиболее выдающихся отечественных и зарубежных химиков	Не знает общих химических понятий и не умеет применять законы к решению простых задач по химии	Полные и системные знания о естественнонаучных законах и закономерностях развития химической науки

Второй этап (уровень)	Уметь: оценивать химические понятия и законы в сложной системе современной химии	Не стремится выполнить работу качественно, не эффективно подбирает необходимые методы	Контролирует факторы, способные повлиять на выполняемую работу, при необходимости корректирует свои действия
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками обязательного ознакомления с предысторией того или иного вопроса, поставленного в его практической и педагогической деятельности	Не способен эффективно использовать свои знания в научной деятельности.	Показывает уверенное владение знаниями во многих направлениях химического анализа

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов), не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Этапы освоения	Результаты обучения ²	Компетенция	Оценочные средства
Знания	Знать стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Индивидуальный, групповой опрос, собеседование, коллоквиум
	Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципы работы стандартных	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос, собеседование, коллоквиум

²Должны соответствовать картам компетенций.

	лабораторных приборов		
	Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос собеседование, коллоквиум
	Знать основные понятия и законы химии	ПК-4 способностью применять естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	
Умения	Уметь проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Индивидуальный, групповой опрос собеседование, коллоквиум
	Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос собеседование, коллоквиум
	Уметь проводить химические эксперименты с использованием химической аппаратуры	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос собеседование коллоквиум
	Уметь оценивать химические понятия и законы в сложной системе воззрений современной химии	ПК- 4 способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	Индивидуальный, групповой опрос собеседование, коллоквиум
	Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть базовыми навыками проведения эксперимента и методами обработки его результатов	ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам		ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос собеседование, коллоквиум

Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос, коллоквиум
Владеть навыками обязательного ознакомления с предысторией или иного вопроса поставленного в его практической и педагогической деятельности	ПК- 4 способностью применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	Индивидуальный, групповой опрос, собеседование, коллоквиум

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

Перевод оценки из 100-балльной в систему зачет/незачет производится следующим образом:

- зачтено– от 59 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- не зачтено– от 0 до 59 баллов.

Критерии оценки (в баллах) аудиторной работы

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;
- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе;
- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе;
- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе;
- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе.

Вопросы для лабораторных занятий

Занятие № 1

1. Теоретические основы ЯМР. Основы теории ЯМР-спектроскопии.
2. Магнитные состояния ядер. Эффект Зеемана.

Занятие №2

3. Уравнение резонанса. Продольная и поперечная релаксация. Время и механизмы релаксации.
4. Классификация спиновых систем. Ядерный эффект Оверхаузера.

Занятие №3

5. Спектры ПМР. Химический сдвиг.
6. Спин-спиновое взаимодействие. Константа ССВ.

Занятие №4

7. Химически- и магнитно-эквивалентные протоны. Интегральная интенсивность сигнала.
8. Динамические эффекты в спектрах ЯМР.

Занятие №5.

9. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов.
10. Расшифровка спектров ПМР.

Занятие №6

11. Временное и частотное представление спектра. Принципы импульсной ЯМР-спектроскопии.
12. Факторы, определяющие химические сдвиги.

Занятие №7

13. Ядра ^{13}C . Характеристики ядра.
14. Спин-спиновое взаимодействие.

15. Характерные диапазоны химических сдвигов в методе ^{13}C .
16. Аддитивные схемы расчета химических сдвигов.

Занятие №8.

17. Константы спин-спинового взаимодействия в ^{13}C .
18. Способы упрощения спектров.

19. Расшифровка спектров ЯМР ^{13}C .
20. Аппаратура в ЯМР спектроскопии.

Занятие № 9

21. Масс-спектрометрия. Ионизация молекул, ее закономерности и методы.
22. Регистрация масс-спектров.

Занятие №10.

23. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования.
24. Определение брутто-формулы и фактора неопределенности.

Занятие №11.

25. Фрагментация ионов, ее причины.
26. Основные схемы фрагментации ионов.

Занятие №12.

27. Основные принципы расшифровки масс-спектров.
28. Анализ области пика молекулярного иона.

Занятие №13

29. Принципиальная схема масс-спектрометра.
30. Основные правила образования отрицательных ионов.

4. Занятие №14

31. Квадрупольный масс-анализатор.
32. Время пролетный масс-анализатор.

Занятие №15.

33. Применение масс-спектрометрии в структурном анализе.
34. Масс-спектрометрия неорганических веществ.

Занятие № 16

35. Физические основы колебательных переходов в молекулах.
36. Валентные, деформационные колебания. Правило отбора

Занятие №17.

38. Условия характеристичности колебаний. Характеристичность по частоте и интенсивности
39. Влияние ближнего и дальнего взаимодействия на частоту колебаний

Занятие №18

40. Основные принципы расшифровки ИК-спектров.

41. Источники ИК-излучения.

Занятие №19.

42. Диспергирующие устройства и приемники излучения.

43. Техника приготовления образцов.

Занятие №20

44. Обертоны. Резонанс Ферми

45. Область «отпечатки пальцев»

Занятие №21

46. Физические основы электронных переходов

47. Хромофоры и ауксохромы. Правило отбора

Занятие №22

48. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения

49. Правило Вудворда-Физера

Критерии оценки (в баллах) коллоквиумов

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 10 баллов выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 15 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 20 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 25 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

Вопросы к коллоквиуму 1

Электронная УФ спектроскопия

Физические основы метода: электронные состояния молекул, классификация электронных переходов в молекулах, правила отбора. Взаимосвязь электронных спектров и структуры органических молекул: хромофоры и ауксохромы, сопряжение хромофоров, неспецифическое и специфическое влияние растворителей, батохромный и гипсохромный сдвиги, гипохромный и гиперхромный эффекты, классификация полос поглощения в электронных спектрах. Избирательное поглощение важнейших ауксохромных и хромофорных групп: насыщенные гетероатомные ауксохромы, карбонильный хромофор, диеновый хромофор, еноновый хромофор, бензольный хромофор, правила Вудворда-Физера. Принцип работы УФ спектрофотометра. Условия измерения УФ спектров. Примеры структурного анализа ненасыщенных органических соединений по спектру поглощения в ближней области УФ спектра.

Колебательная ИК спектроскопия

Физические основы метода: частота и интенсивность поглощения в колебательных спектрах двухатомных молекул, основные колебания многоатомных молекул. Взаимосвязь инфракрасных спектров и структуры органических молекул: валентные и деформационные колебания, характеристичность колебаний и ее физические причины, факторы, вызывающие сдвиг полос поглощения и изменение их интенсивности. Характеристическое поглощение важнейших структурных фрагментов и функциональных групп органических соединений: C–C, C=C, C≡C, C_{аром}–C_{аром}, C_{sp3}–H, C_{sp2}–H, C_{sp}–H, C–O, C–N, O–H, N–H, S–H, C=O, CNO, COOH, COOR, CONaI, NO₂, C≡N. Структурные области ИК спектра. Принципы отнесения полос поглощения. Последовательность проведения структурного анализа. Количественная

ИК спектроскопия. Принцип работы ИК спектрофотометра. Условия измерения ИК спектров. Примеры структурного анализа органических соединений по ИК спектру (область $4000 - 650 \text{ см}^{-1}$).

Вопросы к коллоквиуму 2

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Физические основы метода: магнитные свойства ядер, основное уравнение ядерного магнитного резонанса, взаимодействия магнитных моментов ядер (тонкая и сверхтонкая структура сигналов ядер). Выбор резонансного ядра при изучении строения органических соединений. Принцип работы ЯМР спектрометра. Анализ спектров ядерного магнитного резонанса ядер со спиновым квантовым числом $I=1/2$: химическая и магнитная эквивалентность ядер, номенклатура ядерных систем, A_2 , AX , AB и A_2B системы, индекс связывания, спектры первого и второго порядка, основные правила анализа спектров первого порядка, расшифровка простейших спектров второго порядка, приемы упрощения сложных спектров. Спектроскопия протонного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов протонов, их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов; константы спин-спинового взаимодействия J_{H-H} . Двойной резонанс. Спектроскопия углеродного магнитного резонанса: шкала химических сдвигов ядер ^{13}C , их характеристичность, закономерности в изменении значений химических сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C . Константы спин-спинового взаимодействия J_{C-H} , полное и частичное подавление спин-спинового взаимодействия ядер ^{13}C и протонов. Ядерный эффект Оверхаузера. Понятие о спектроскопии ядерного магнитного резонанса динамических систем (обменные процессы). Двумерная спектроскопия ЯМР. Примеры структурного анализа органических соединений по спектрам ПМР и ЯМР ^{13}C .

Масс-спектрометрия

Физические основы метода: принцип работы масс-спектрометра, его разрешающая сила, образование масс-спектра, основное уравнение масс-спектрометрии, типы регистрируемых ионов (молекулярные, осколочные, метастабильные, многозарядные). Определение молекулярной брутто-формулы по масс-спектру: метод точного измерения масс молекулярных ионов, метод измерения интенсивностей пиков ионов, изотопных молекулярному иону. Качественные теории масс-спектрометрии органических соединений: теория локализации заряда, теория устойчивости продуктов фрагментации. Масс-спектрометрические правила: азотное, "четно-электронное", затрудненный разрыв связей, прилежащих к ненасыщенным системам. Основные типы реакций распада органических соединений под электронным ударом: простой разрыв связей (α -разрыв, бензильный и аллильный разрывы), ретро-реакция Дильса-Альдера, перегруппировка Мак-Лафферти, скелетные перегруппировки, ониевые реакции. Термические реакции в масс-спектрометре. Установление строения органических соединений: метод функциональных групп, метод характеристических значений m/z . Основные направления фрагментации органических соединений под электронным ударом (углеводородов и их галогенпроизводных, спиртов, фенолов, простых эфиров, альдегидов, кетонов, аминов, карбоновых кислот и их производных). Понятие о методе химической ионизации и хромато-масс-спектрометрии. Примеры структурного анализа органических соединений по масс-спектру низкого разрешения.

Спектрометрическая идентификация органических соединений (совместное использование масс-спектрометрии, УФ, ИК, ПМР и ЯМР ^{13}C спектроскопии)

Особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов. Алгоритм структурного анализа Примеры решения задач структурного анализа, имеющих различную степень сложности

Комплект заданий для контрольной работы

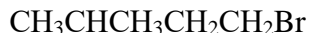
Тема: Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Вариант 1

Задание 1. Установите структуру соединения C_3H_5NO по его спектру ПМР :2,6(триплет);3,8(триплет);4,3(уширенный сигнал);соотношение интенсивностей сигналов 2:2:1.

Задание 2. Построить ПМР –спектр соединения: $C_6D_5-CHDSCH_2COOD$.

Задание 3. Рассчитать химические сдвиги углерода в соединении :



Вариант 2

Задание 1. По данным спектра ПМР (два синглета при 3,9 и 7,9 м.д.) и брутто-формуле $C_2H_4OCl_2$ установите строение соединения.

Задание 2. Построить ПМР-спектр соединения: $C_6H_5CHDCl_2NHCOCH_2D$

Задание 3. Рассчитать химические сдвиги углерода в соединении: $CH_3C(CH_3)_2CH_2CH(CH_3)_2$

Тема: Масс-спектрометрия

Вариант 1 .

Задание 1. Определите структуру соединения $C_{10}H_{14}$ по данным масс-спектра(m/e):134(28);119(100);91(48);79(12);77(12);65(8).

Задание 2. Как образуются ионы с m/e 45 и 59 при распаде втор-бутилового эфира?

Вариант 2

Задание 1. Определите структуру соединения C_8H_{16} по данным масс-спектра (m/e):112(12);97(12);71(5);57(100);41(44);29(22).

Задание 2. Как образуются ионы с m/e 44 и M-1 при распаде масляного альдегида?

Тема : ИК-спектроскопия

Вариант 1

Задание 1. Определите строение соединения C_3H_7ClO по данным ИК-спектра

Задание 2. Соотнесите данные ИК-спектра со структурой фенола

Вариант 2

Задание 1. Определите строение соединения C_6H_6ClN по данным ИК-спектра

Задание 2. Соотнесите данные ИК-спектра со структурой метанола

Тема: УФ-спектроскопия

Задание 1. Рассчитайте максимальную длину волны для соединения

Задание 2. Рассчитайте максимальную длину волны для соединения

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не решил ни одну задачу;
- 10 баллов выставляется студенту, если решил одну задачу и допустил ошибку в решении второй задачи;
- 20 баллов выставляется студенту, если студент решил две задачи из трех;
- 25 баллов выставляется студенту, если студент правильно решил все задачи

Комплект тестов (тестовых заданий)

- 1. Тестовый вопрос 1:** Рентгенофлуоресцентным методом можно определять начиная с
 - а) магния;
 - б) кальция;
 - в) серы;
 - г) железа;
- 2. Тестовый вопрос 2:** Дифракция рентгеновских лучей подчиняется уравнению Вульфа-Брегга
 - а) $2dn = \sin\theta$;
 - б) $2d\sin\theta = n\lambda$;
 - в) $\lambda = 2d\sin\theta$;
 - г) $2d = n\lambda\sin\theta$;
- 3. Тестовый вопрос 3:** Изменение материала анода рентгеновской трубки приводит к изменению
 - а) параметра кристаллической решетки;
 - б) кристаллографической текстуры;
 - в) положения пиков на рентгенограмме;
 - г) плотности дислокации;
- 4. Тестовый вопрос 4:** Диапазон длин волн рентгеновского излучения
 - а) 0,1-100 Å°;
 - б) 100-200 Å°;
 - в) 0,01-0,1 Å°;
 - г) 1-100 Å°;
- 5. Тестовый вопрос 5:** Тип замещения бензольных соединений можно определить по поглощению в области
 - а) 2000-1600 см⁻¹;
 - б) 1400-700 см⁻¹;
 - в) 3100-2800 см⁻¹;
 - г) 1800-1400 см⁻¹;
- 6. Тестовый вопрос 6:** Сопряжение карбонильной группы с кратными связями снижает частоту колебаний $\nu_{C=O}$ на
 - а) 20-30 см⁻¹;
 - б) 40-50 см⁻¹;
 - в) 30-40 см⁻¹;
 - г) 10-20 см⁻¹;
- 7. Тестовый вопрос 7:** Типичная область колебаний N-H группы, см⁻¹:
 - а) 3500-3300 ;
 - б) 400-100;
 - в) 3000-2600;
 - г) 1200-800;
- 8. Тестовый вопрос 8:** Кюветное отделение размещают между источником излучения и монохроматором
 - а) в спектрофотометрах для УФ- области ;
 - б) в инфракрасных спектрометрах;
 - в) в рентгеновских спектрометрах;
 - г) в флуориметрах;
- 9. Тестовый вопрос 9:** Для вычисления максимума полосы поглощения сопряженных углеводов используется формула
 - а) $\lambda_{\text{макс}} = 250 + \sum$;
 - б) $\lambda_{\text{макс}} = 217 + \sum$;
 - в) $\lambda_{\text{макс}} = 215 + \sum$;

г) $\lambda_{\text{макс}}=202+\Sigma$;

10. Тестовый вопрос 10: Практическое значение в УФ-спектрометрии имеют переходы, длина волны которых попадает в рабочий диапазон прибора

- а) $\sigma \rightarrow \sigma^*$;
- б) $\pi \rightarrow \pi^*$ и $n \rightarrow \pi^*$;
- в) $n \rightarrow \sigma^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$;
- г) $\sigma \rightarrow \sigma^*$ и $n \rightarrow \sigma^*$;

11. Тестовый вопрос 11: К хромофорам не относится группа

- а) -NH_2 ;
- б) -COOH ;
- в) $> \text{C=O}$;
- г) $\text{-C} \equiv \text{N}$;

12. Тестовый вопрос 12: Под действием УФ-излучения наиболее легко возбуждаются электроны

- а) обычной π -связи;
- б) σ -связи;
- в) внутренних оболочек;
- г) участвующие в сопряжении;

13. Тестовый вопрос 13: В масс-спектре карбоновых кислот максимальную интенсивность имеет ион с массовым числом

- а) 31 $(\text{CH}_2=\text{OH})^+$;
- б) 44 $(\text{CO}_2)^+$;
- в) 45 $(\text{COOH})^+$;
- г) 60 $(\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})_2)^+$;

14. Тестовый вопрос 14: Перегруппировка Мак-Лафферти характерна для

- а) алкенов;
- б) изоалканов;
- в) альдегидов;
- г) спиртов;

15. Тестовый вопрос 15: g-фактор спектроскопического расщепления для свободного электрона принимает значение, равное

- а) 2,00232;
- б) 2,0036;
- в) 2,00059;
- г) 2,00186;

16. Тестовый вопрос 16: Магнитными свойствами не обладает ядро

- а) ^{13}C ;
- б) ^{19}F ;
- в) ^{12}C ;
- г) ^{31}P ;

17. Тестовый вопрос 17: Дейтерированные растворители влияют на

- а) химический сдвиг сигнала;
- б) мультиплетность сигнала;
- в) интегральную интенсивность;
- г) константу спин-спинового взаимодействия;

18. Тестовый вопрос 18: Протоны ароматических соединений резонируют в области слабого поля из-за

- а) взаимодействия протонов с π -электронами двойной связи;
- б) сопряженной π -электронной системы;
- в) кольцевого тока;
- г) изменения напряженности магнитного поля;

19. Тестовый вопрос 19: Особенностью метода ЯМР ^{13}C является:

- а) наличие спин-спинового взаимодействия между углеродными атомами;

- б) наличие спин-спинового взаимодействия между углеродом и протоном;**
- в) отсутствие спин-спинового взаимодействия между углеродом и протоном;**
- г) появление сверхтонкого расщепления;**

20. Тестовый вопрос 20: Ионизацию, разделение ионов и детектирование в масс-спектрометрии проводят при следующих условиях

- а) высокое давление;**
- б) нормальное давление и комнатная температура;**
- в) нормальное давление и высокая температура;**
- г) глубокий вакуум;**

Критерии оценки (в баллах):

- 0 баллов выставляется студенту, если не ответил ни на один вопрос;
- 10 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 50% вопросов;
- 15 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на 75% вопросов;
- 20 баллов выставляется студенту, если студент правильно ответил на все вопросы.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. Физические методы исследования в химии. М. Мир. 2006. - 683с.
2. М. Отто. Современные методы аналитической химии. М. Техносфера. 2008. - 544с.
3. Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М. Бином. 2012. - 557с.

Дополнительная литература:

4. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. Р. Кельнер. Ж.-М. Мерме. М. Мир. 2004. - 726с.
5. А. Т. Лебедев. Масс-спектрометрия в органической химии. М. Бином. 2003. - 493.
6. А. А. Ищенко. Аналитическая химия. Физико-химические методы анализа. Т. 2. Академия. 2010. - 416с.
7. В. А. Васильев. Аналитическая химия. Кн. 2. Дрофа. 2005, 2007, 2008.
8. Основы аналитической химии. Т. 2. под ред. Ю. А. Золотова. 2012. Академия.
9. В. И. Вершинин, И. В. Власова, И. А. Никифорова. Аналитическая химия. Академия. 2010. - 448с.
10. О. Преч, Ф. Бюльманн, К. Афвольтер. Определение строения органических соединений. М. Мир. 2009. - 398с.
11. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, А. В. Сидельников. Физические методы анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2016. - 80с.
12. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, Ю. Ю. Гайнуллина. Масс-спектрометрический метод анализа. Уфа. РИЦ БашГУ. 2018. - 112с.
13. Р. Н. Ширяева, Э. Р. Валинурова, Л. Б. Резник. Исследование структуры органических молекул методами электронной и инфракрасной спектроскопии. Уфа. РИЦ БашГУ. 2008. - 80с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License
10. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления

образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
	Физические методы исследования	<p>1.учебная аудитории для проведения занятий лекционного типа: аудитория №305 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), № 311 (химфак корпус), № 405 (химфак корпус)</p> <p>2.учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: лаборатория №316 (химфак корпус); лаборатория №317 (химфак корпус).</p> <p>3. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311(химфак корпус), аудитория № 310(химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p>4.помещение для самостоятельной работы: читальный зал №1 (главный корпус), читальный зал № 2 (физмат корпус-учебное), читальный зал №5 (гуманитарный корпус), читальный зал №6 (учебный корпус), читальный зал №7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 320 (химфак корпус).</p> <p>5.помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного</p>	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска,ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см SpectraClassic.</p> <p>Аудитория.№ 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Mattewhite.</p> <p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, ноутбук,мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный ClassicNorma 244*183.</p> <p>Лаборатория 316 Учебная мебель, Аналитический комплекс ИВА, РМС «Ионометрия» Колорометрия, 2 РН-метра, «Анион-4100»</p> <p>Лаборатория 317 Учебная мебель, РМС «Ионометрия», УЛК «Экологический мониторинг» (учебно-лабораторный комплекс), Потенциостат-Гальвонастат Р-8nano, 2 фотоэлектроколориметра КФК 2МП, весы аналитические ОНАУС</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G,</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензиибессрочные</p> <p>2. MicrosoftOfficeStandard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. KasperskyEndpointSecurity для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. LinuxOpenSUSE 12.3 (x84_64) GNUGeneralPublicLicense</p>

		<p>оборудования: лаборатория 318 (химфак корпус)</p>	<p>персональный компьютер LenovoThinkCentre A70z IntelPentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPONeos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Читальный зал №1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p>Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал №5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал №6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал №7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Лаборатория №320 Учебная мебель, Рентгенофлуоресцентный спектрометр в комплекте с оборудованием подготовки проб, Аппарат АРН-ЛАТ-03 для разгонки нефтепродуктов , Весы GR-200, Набор</p>	
--	--	---	--	--

			<p>ареометров АОН-1, Рефрактометр PAL-2, Ноутбук ASUS Лаборатория № 318 Учебная мебель, МФУ М Samsung лазерный SCX- 4623F, Компьютер в составе: системный блок DEPO 460MDi5-650, монитор, клавиатура, мышь, Рефрактометр, набор ариометров, 2 рН-метра АНИОН-4100, 2 рН-метра НП98103 Checker1.</p>	
--	--	--	---	--

Приложение № 1

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Физические методы исследования

на 7 семестр

очная

форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	60,7
лекций	16
практических/ семинарских	-
лабораторных	44
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся(СР)	83,3
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (контроль)	

Форма(ы) контроля:
зачет 7 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	<p>Спектрометрия ядерного магнитного резонанса(¹Н и ¹³С). Химический сдвиг, его происхождение. Зависимость химического сдвига от различных факторов. Аддитивные схемы расчетов химических сдвигов для алканов, алкенов, производных бензола.</p> <p>Спин –спиновое взаимодействие, его происхождение. Формальный и полуформальный методы расчета интенсивностей линий мультиплета. Методика расшифровки ПМР-спектров . Особенности спектрометрии ЯМР ¹³С. Получение спектров – полное, частичное подавление спин-спинового взаимодействия с протонами. Химические сдвиги ядер ¹³С, зависимость их от различных факторов и</p>	6	-	16	20	Осн.1,2 Доп.10,11	Проработать литературу 7	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум

	аддитивные схемы расчетов. Расшифровка спектров ЯМР ¹³ C.							
2.	Электронный парамагнитный резонанс. Особенности спектрометрии ЭПР. g-Фактор и закономерности его измерения. Условия резонанса в ЭПР. Сверхтонкое взаимодействие в спектрах ЭПР, его происхождение и основные закономерности расщепления сигнала. Аппаратура	2	-	-	15	Осн.1 Доп.7,8	Проработать литературу 8	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум
3.	Масс-спектрометрия. Ионизация молекул и общие закономерности регистрации спектров в масс-спектрометрии. Пики молекулярных ионов и закономерности их образования и интенсивности. Определение брутто-формулы с использованием изотопных ионов. Фрагментация ионов и ее закономерности. Методика по расшифровке масс-спектров.	4	-	14	20	Осн.3 Доп.5,12	Проработать литературу 9	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум
4.	ИК-спектрометрия. Физические основы колебательных переходов в молекулах: гармонические, ангармонические колебания, обертоны. Валентные и деформационные колебания. Число колебаний. Правила	3	-	10	15	Осн.1.3 Доп.4,13	Проработать литературу 6	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум

	отбора. Условия характеристичности колебаний. Основные области ИК- спектра и принципы ее расшифровки. Аппаратура. Приготовление образцов.							
5	УФ-спектроскопия. Физические основы электронных переходов, их закономерности и классификация. Переходы с переносом заряда. Правила отбора. Хромофоров и ауксохромов. Факторы, влияющие на электронные спектры поглощения: влияние $\pi \rightarrow \pi$ - и $p \rightarrow \pi$ -сопряжения, заместителей, водородной связи, напряженности цикла. Правило Вудворда	1	-	4	13,3	Осн.1,2 Доп.4.13	Проработать литературу 8	Проверка домашней и аудиторной работы, коллоквиум
	Всего часов:	16		44	83,3			

РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫФизические методы исследования

Специальность 04.03.01 «Химия»

курс IV, семестр 7

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			минимальный	максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	3	5	0	15
2. Тестовый контроль	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	25	1	0	25
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Аудиторная работа	3	5	0	15
2. Тестовый контроль	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	25	1	0	25
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада				
2. Публикация статей				
3. Работа со школьниками (кружок, конкурсы, олимпиады)				
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий	-0,7	8	0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)	-0,2	44	0	-10